УДК 621.314

ДИНАМИКА ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В СТРУКТУРНОНЕУСТОЙЧИВОМ КРИСТАЛЛЕ

Е.Е. Слядников

Отдел проблем информатизации ТНЦ СО РАН. г. Томск
E-mail: slyad@cc.tpu.edu.ru

Теоретически показано, что мягкая мода в окрестности структурного перехода исходная структура — предпереходное состояние — конечная структура, вынужденного как изменением температуры, так и внешней силы, переторможена и, следовательно, динамика параметра порядка имеет релаксационный характер.

1. Введение

Экспериментально обнаружено, что кристалл, неустойчивый относительно структурного перехода исходная – конечная структура, вызванного как изменением температуры, так и внешней силы, в окрестности структурного перехода находится в предпереходном состоянии [1, 2]. Для теоретического описания структурного перехода и предпереходного состояния сформулирована микроскопическая модель [3], описывающая структурнонеустойчивый кристалл как квантовую систему псевдоспинов. Причина возникновения предпереходного состояния в кристалле в том, что изменение внешнего воздействия (температуры, механической силы), стимулирующее структурный переход исходная – конечная структура, уменьшает площадь горба, разделяющего минимумы двухямного кристаллического потенциала атома. Это приводит к существенному увеличению квантового туннелирования атома и уменьшению асимметрии двухямного кристаллического потенциала. Возникает неустойчивость

состояния исходной кристаллической решетки с асимметричным двухямным потенциалом относительно возникновения предпереходного состояния решетки с симметричным двухямным потенциалом. В результате на верхней границе неустойчивости (при температуре T^+) возбуждается мягкая коллективная мода – псевдоспиновая волна, переводящая кристалл из исходной структуры в предпереходное состояние. При дальнейшем уменьшении внешнего воздействия на нижней границе неустойчивости (при температуре T^-) происходит конденсация мягкой псевдоспиновой волны, которая переводит кристалл из предпереходного состояния в конечную структуру. В рамках приближения молекулярного поля (ПМП) [3] можно изучить только термодинамические (стационарные) свойства структурного перехода и предпереходного состояния. Поэтому для изучения динамических свойств структурнонеустойчивого кристалла, например, частоты мягкой псевдоспиновой волны, необходимо выйти за рамки ПМП и использовать приближение хаотических фаз (ПХФ) [4].

В настоящей работе с помощью ПХФ показано, что при почти непрерывном переходе исходная структура – предпереходное состояние – конечная структура собственная коллективная мода системы псевдоспинов смягчается и спонтанно возникает разница заполнения левой и правой ям потенциального рельефа, то есть происходит Бозе-конденсация псевдоспиновой волны. Если не учитывать релаксацию системы псевдоспинов в окрестности структурного перехода, то это приводит к динамике с незаторможенной мягкой модой. Однако, хорошо известно, что вблизи структурного перехода динамика параметра порядка является колебательно-релаксационной и описывается уравнением типа Ландау-Халатникова [5], причем мягкая мода, как правило, перезаторможена [6]. В этой связи возникает задача учета релаксации системы псевдоспинов в окрестности структурного перехода исходная структура – предпереходное состояние – конечная структура.

2. Гамильтониан системы и основные уравнения

Поскольку нас интересует отклик системы псевдоспинов на компоненту механического поля напряжений $\Omega_i(t)$, изменяющую асимметрию двухямного потенциального рельефа и зависящую от времени и пространственных координат, запишем гамильтониан квантовой системы псевдоспинов в виде [3]

$$H = -\sum_i \{-\hbar\omega_0 \hat{S}_i^x + [(1/2)\sum_j \hbar J_{ij}\hat{S}_j^z + +(1/3)\sum_{j,m} \hbar I_{ijm}\hat{S}_j^z\hat{S}_m^z + \hbar\Omega_i(t)]\hat{S}_i^z\}. \quad (1)$$

Здесь $\hat{S}_i^x$, $\hat{S}_i^y$, $\hat{S}_i^z$ – операторы Паули для спина ½, $\hbar\omega_0$ – расщепление энергий четного и нечетного состояний атома в двухямном потенциале, $\hbar J_{ij}$ ($\hbar I_{ijm}$) – константа двухчастичного (трехчастичного) взаимодействия псевдоспинов. Вследствие временной зависимости H средние значения спиновых переменных также зависят от времени, поэтому будем обозначать их $S_i^\alpha(t) = \langle\hat{S}_i^\alpha\rangle_t$.

Для исследования динамики системы псевдоспинов, описываемой гамильтонианом (1), используем стандартную методику построения теории хаотических фаз [4]. Гейзенберговские уравнения движения для средних значений спиновых операторов (в системе единиц, где $\hbar$=1) имеют вид

$$d\vec{S}_i(t)/dt = -i < [\hat{\vec{S}}_i, H] >_t . \quad (2)$$

В приближении хаотических фаз, являющемся прямым обобщением ПМП на случай задач с временной зависимостью уравнения движения (2) приобретают вид

$$d\vec{S}_i(t)/dt = \vec{S}_i(t) \times \vec{h}_i(t), \quad (3)$$

где зависящее от времени молекулярное поле $\vec{h}_i(t)$ дается выражением

$$h_i(t) = -[\partial < H >_t / \partial\vec{S}_i(t)]. \quad (4)$$

Эти уравнения эквивалентны уравнениям для свободной прецессии псевдоспина вокруг мгновенного значения молекулярного поля в данном узле. Однако в ур. (3, 4) не содержится релаксация системы псевдоспинов, которая, как было сказано выше, играет принципиальную роль в окрестности структурного перехода. Остается, таким образом, дополнить (3, 4) членами, описывающими релаксацию. Вначале заметим, что (3) обладает хорошо известным интегралом движения

$$\vec{S}_i^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = (S^{0x})^2, \quad (5)$$

где S^{0x} – термодинамически равновесное значение S^x в предпереходном состоянии кристалла.

Структурный переход и динамика параметра порядка в его окрестности – это коллективные явления. Отсюда можно предположить, что эффекты смягчения собственной коллективной моды и релаксации в окрестности перехода также имеют коллективный (когерентный) характер и поэтому не нарушают закон сохранения (5), как это имеет место в теории ферромагнетизма [7]. Следуя и дальше отмеченной аналогии, перепишем (3) с учетом релаксации, опуская индекс узла i, в виде

$$d\vec{S}/dt = \vec{S} \times \vec{h} + \vec{R}, \quad (6)$$

$$\vec{R} = -\lambda[\vec{S} \times [\vec{S} \times \vec{h}]] = -\lambda[(\vec{S}\vec{h})\vec{S} - (S^{0z})^2\vec{h}]], \quad (7)$$

где $\vec{R}$ – релаксационный член, а λ – феноменологический параметр. В [8] было показано, что в низкочастотном приближении механизмы нелинейности, с одной стороны, дисперсии и диссипации – с другой, могут быть учтены аддитивным образом. Используем низкочастотное приближение, выражающееся в нашем случае неравенством

$$\omega < \min(\omega_c, \tau^{-1}). \quad (8)$$

Здесь ω – характерная частота динамического процесса, ω_c – частота мягкой коллективной моды, τ – время коллективной релаксации параметра по-

рядка S^z. Принимая во внимание замечание о возможности аддитивного учета нелинейности, с одной стороны, дисперсии и диссипации – с другой, в приближении (8) линеаризуем (7) по S^z, S^y, S^x, Ω. Введем эффективную статическую восприимчивость χ^{ef}, определяемую соотношением

$$\vec{S}^0 = \chi^{ef}\vec{h}^0, \tag{9}$$

где $\vec{S}^0$ и $\vec{h}^0$ – соответствующие равновесные значения $\vec{S}$ и $\vec{h}$. Из (3, 4, 9) при $d\vec{S}/dt$=0 следует, что

$$\chi^{ef} = -S^{0x}/\omega_0 = \omega_0^{-1}\text{th}(\hbar\omega_0/2k_BT), \tag{10}$$

где k_B – постоянная Больцмана. Здесь использовано выражение для термодинамически равновесного значения S^x в предпереходном состоянии кристалла [3]. Тогда после линеаризации $\vec{R}$ из (6, 10) находим векторное уравнение

$$d\vec{S}/dt = \vec{S}\times\vec{h} - \gamma(\vec{S} - \chi^{ef}\vec{h}), \tag{11}$$

$$\gamma = -\lambda\omega_0 S^{0z} \approx \lambda\omega_0^2/2J. \tag{12}$$

Компоненты вектора молекулярного поля, согласно (4), имеют вид

$$\vec{h} = (-\omega_0, 0, J_0S^z + I_0(S^z)^2 + \Omega(t)), \tag{13}$$

где $J_0=\sum_j J_{ij}$, $I_0=\sum_{j,m} I_{ijm}$.

3. Уравнения динамики системы псевдоспинов без учета релаксации

Поскольку S_i^y=0 (11–13), как в предпереходном состоянии, так в исходной и конечной структурах, то уравнения движения для компонент вектора флуктуации псевдоспина $\delta\vec{S}_i$ без учета релаксации приобретают вид

$$i\omega\delta S_i^x = \{\sum_j[J_{ij}S_j^{0z} + \sum_m I_{ijm}S_j^{0z}S_m^{0z}]\}\delta S_i^y + \\ +\{\sum_j[J_{ij} + 2\sum_m I_{ijm}S_m^{0z}]\delta S_j^z + \Omega_i\}\delta S_i^y, \tag{14}$$

$$i\omega\delta S_i^y = \{\omega_0 - S_i^{0x}\sum_j[J_{ij} + 2\sum_m I_{ijm}S_m^{0z}]\delta S_j^z\} - \\ -\{\sum_j[J_{ij}S_j^{0z} + \sum_m I_{ijm}S_j^{0z}S_m^{0z}]\}\delta S_i^x - \\ -S_i^{0x}\delta\Omega_i - \{\sum_j[J_{ij} + 2\sum_m I_{ijm}S_m^{0z}]\delta S_j^z + \Omega_i\}\delta S_i^x, \tag{15}$$

$$i\omega\delta S_i^z = -\omega_0\delta S_i^y. \tag{16}$$

Теперь (14–16) – это система $3N$ нелинейных уравнений, связывающих амплитуды флуктуаций псевдоспинов относительно молекулярного поля с амплитудой зависящей от времени компоненты механического поля напряжений. Собственные частоты системы псевдоспинов можно вычислить, полагая Ω_i=0 и решая однородную систему линейных уравнений (14–16) относительно ω. Представленная выше система $3N$ уравнений может быть сведена к N системам трех уравнений для заданного волнового вектора путем преобразования к нормальным координатам. Фурье-образы средних значений операторов флуктуации псевдоспина являются искомыми коллективными переменными:

$$\delta S_{\vec{q}} = \sum_i \delta S_i \exp(-i\vec{q}\vec{R}_i),\ \delta\Omega_{\vec{q}} = \sum_i \Omega_i \exp(-i\vec{q}\vec{R}_i). \tag{17}$$

Рассмотрим свободную прецессию псевдоспина в предпереходном состоянии кристалла, достигнутом за счет изменения температуры, где S_i^{0z}=0. Используя координаты (17), получаем для прецессионного движения с волновым вектором $\vec{q}$ систему нелинейных уравнений Блоха

$$i\omega\delta S_{\vec{q}}^x = \{J_{\vec{q}}\delta S_{\vec{q}}^z + \delta\Omega_{\vec{q}}\}\delta S_{\vec{q}}^y, \tag{18}$$

$$i\omega\delta S_{\vec{q}}^y = \{\omega_0 - J_{\vec{q}}S^{0x}\}\delta S_{\vec{q}}^z - \\ -S^{0x}\delta\Omega_{\vec{q}} - \{J_{\vec{q}}\delta S_{\vec{q}}^z + \delta\Omega_{\vec{q}}\}\delta S_{\vec{q}}^x, \tag{19}$$

$$i\omega\delta S_{\vec{q}}^z = -\omega_0\delta S_{\vec{q}}^y. \tag{20}$$

Однородная система линеаризованных уравнений (18–20) при $d\Omega_{\vec{q}}$=0 имеет нетривиальное решение только в случае, если определитель этой системы тождественно равен нулю. Решая секулярное уравнение для собственных частот в духе [4], получим

$$\omega_1(\vec{q}) = 0, \tag{21}$$

$$\omega_{2,3}(\vec{q}) = \omega_0(\omega_0 - J_{\vec{q}}S^{0x}),\ S^{0x} = (1/2)\text{th}(\omega_0/2k_BT). \tag{22}$$

Решение $\omega_1(\vec{q})$=0 (21) соответствует продольной моде, то есть флуктуации в направлении молекулярного поля, параллельного S^x в предпереходном состоянии кристалла. Два других решения $\omega_{2,3}(\vec{q})$ (22) отвечают поперечным флуктуациям и описывают свободную прецессию псевдоспинов относительно молекулярного поля. Однако на нижней и верхней границе интервала (T^-,T^+) частота прецессии становится малой величиной вследствие ослабления двухчастичного взаимодействия псевдоспинов когда

$$2\omega_0 - J_{\vec{q}}\text{th}(\omega_0/2k_BT) \to 0, \tag{23}$$

то есть при $T\to T_c$. Разумно предположить, что, по крайней мере, в пределе $T_c\to T_{MA}$ (23), структурный переход из предпереходного состояния в исходную (конечную) фазу связан с конденсацией мягкой псевдоспиновой волны. В окрестности T_c можно разложить $\omega_{2,3}(\vec{q}_0)$ по степеням $T-T_c$

$$\omega_{2,3}{}^2(\vec{q}_0) = (\partial\omega_{2,3}{}^2(\vec{q}_0)/\partial T)_{T=T_c}(T-T_c) = \\ = \lambda(\vec{q}_0)(T-T_c)/T_c, \tag{24}$$

$$\lambda(\vec{q}_0) = (\omega_0^2 J(\vec{q}_0)/4k_BT_c^2)\text{ch}^{-2}(\omega_0/2k_BT_c), \tag{25}$$

в то время как $\omega_{2,3}{}^2(\vec{q}\neq\vec{q}_0)_{T=T_c}\neq 0$, где $\vec{q}_0$ волновой вектор мягкой (критической) моды. В предпереходном состоянии при $T_c\to T_{MA}$ квадрат частоты мягкой псевдоспиновой волны, как и в случае мягких фононов, является линейной функцией $T\to T_c$ (24, 25) в окрестности точки T_c.

Исходная (конечная) структура определяется "замороженными" смещениями в левую (правую) яму двухямного потенциального рельефа, отвечающими мягкой моде. Параметром порядка, который

представляет собой замороженную координату, соответствующую мягкой нормальной моде, в данном случае служит однородная спонтанная разность заполнения (поляризация) левого и правого минимума двухямного потенциального рельефа. Положительное значение разности заполнения соответствует исходной структуре, а отрицательное значение – конечной фазе. В предпереходном состоянии разность заполнения левого и правого минимума двухямного потенциального рельефа равна нулю.

В состоянии исходной (конечной) структуры величина S^{0x}, так же как и S^{0z}, отлична от нуля и молекулярное поле имеет в плоскости xz направление, в общем случае не совпадающее с направлением осей (11–13). Используя ту же процедуру, получим нелинейные уравнения движения, соответствующие волновому вектору $\vec{q}$

$$i\omega\delta S^x_{\vec{q}} = \{J_0 S^{0z}_{\vec{q}} + I_0 (S^{0z})^2\}\delta S^y_{\vec{q}} + \\ +\{(J_{\vec{q}} + 2I_{\vec{q}} S^{0z})\delta S^z_{\vec{q}} + \delta\Omega_{\vec{q}}\}\delta S^y_{\vec{q}}, \qquad (26)$$

$$i\omega\delta S^y_{\vec{q}} = \{\omega_0 - (J_{\vec{q}} + 2I_{\vec{q}} S^{0z})S^{0x}\}\delta S^z_{\vec{q}} - \\ -\{J_0 S^{0z} + I_0 (S^{0z})^2\}\delta S^x_{\vec{q}} - \\ -S^{0x}\delta\Omega_{\vec{q}} - \{(J_{\vec{q}} + 2I_{\vec{q}} S^{0z})\delta S^z_{\vec{q}} + \delta\Omega_{\vec{q}}\}\delta S^x_{\vec{q}}, \qquad (27)$$

$$i\omega\delta S^z_{\vec{q}} = -\omega_0 \delta S^y_{\vec{q}}. \qquad (28)$$

Однородная система линеаризованных уравнений (26–28) при $d\Omega_{\vec{q}}=0$ имеет нетривиальное решение только в случае, если определитель этой системы тождественно равен нулю. Решая секулярное уравнение аналогичным образом, получим в предпереходном состоянии

$$\omega_1(\vec{q}) = 0, \qquad (29)$$

а два других имеют вид

$$\omega^2_{2,3}(\vec{q}) = [J_0 S^{0z} + I_{\vec{q}}(S^{0z})^2]^2 + \\ +\omega_0(\omega_0 - J_{\vec{q}} S^{0x} - 2I_{\vec{q}} S^{0z} S^{0x}). \qquad (30)$$

Поскольку для исходной (конечной) структуры при $T \to T_c$ выполняется $S^{0x} \to \omega_0/J_0$, то моды псевдоспиновых волн $\omega_1=0$, а $\omega_{2,3}$ является критической только в длинноволновом пределе $\vec{q} \to 0$ (29, 30). В этом предельном случае квадрат частоты мягкой моды определяется спонтанной разностью заполнения

$$\omega^2_{2,3}(\vec{q}) = [J_0 S^{0z} + I_{\vec{q}}(S^{0z})^2]^2 - (2I_{\vec{q}}/J_0)\omega_0^2 S^{0z}. \qquad (31)$$

При $T \to T_c$ и $T_c \to T_{MA}$ параметр порядка S^{0z} стремится к нулю [3], следовательно, собственные частоты $\omega_{2,3}(0)$ также стремятся к нулю (31). В то время как в предпереходном состоянии мода псевдоспиновых волн может стать мягкой модой при любом значении критического волнового вектора $\vec{q}_0$ (из области $0 \le \vec{q}_0 \le \vec{q}_{е,з,Б}$), для которого $J_{\vec{q}}$ имеет максимум, в исходной (конечной) структуре мода становится мягкой только при $\vec{q} \to 0$. Если критическое значение волнового вектора в предпереходном состоянии равно $\vec{q} \to 0$, тогда собственные векторы флуктуаций псевдоспинов одинаковы как в предпереходном состоянии, так и в исходной (конечной) фазе.

4. Уравнения динамики системы псевдоспинов с учетом релаксации

Перепишем для удобства векторное ур. (6) в виде системы трех уравнений для компонент псевдоспина $\vec{S}$

$$\dot{S}^x = [J_0 S^z + I_0 (S^z)^2 + \Omega]S^y - \gamma[S^x - S^{0x}], \qquad (32)$$

$$\dot{S}^y = -[J_0 S^z + I_0 (S^z)^2 + \Omega]S^x - \omega_0 S^z - \gamma S^y, \qquad (33)$$

$$\dot{S}^z = \omega_0 S^y - \gamma\{S^z + [J_0 S^z + I_0 (S^z)^2 + \Omega]S^{0x}\omega_0^{-1}\}. \qquad (34)$$

Покажем, что из (32–34) в низкочастотном режиме вытекает уравнение типа Ландау-Халатникова. Дифференцируя по времени и используя простые алгебраические преобразования, сведем (32–34) к системе двух уравнений:

$$\ddot{S}^z + \gamma[2 + \omega_0^{-1} S^{0x}(J_0 + 2I_0 S^{0z})]\dot{S}^z + \\ +\gamma\omega_0^{-1} S^{0x}\dot{\Omega} + [\omega_0^2 + \gamma^2](1 + \omega_0^{-1} S^{0x} J_0)S^z + \\ +\omega_0^{-1} S^{0x} I_0 S^{0z}[\omega_0^2 + \gamma^2](S^z)^2 + \\ +\omega_0[J_0 S^z + I_0 (S^z)^2 + \Omega]\delta S^x = -\omega_0 S^{0x}[\omega_0^2 + \gamma^2]\Omega, \qquad (35)$$

$$\delta\dot{S}^x = -\gamma\delta S^x + \omega_0^{-1}[J_0 S^z + I_0 (S^z)^2 + \Omega] \times \\ \times(\dot{S}^z + \gamma\{S^z + S^{0x}\omega_0^{-1}[J_0 S^z + I_0 (S^z)^2 + \Omega]\}), \qquad (36)$$

где $\delta S^x = S^x - S^{0x}$. Разрешая систему ур. (35, 36) относительно Ω как функции параметра порядка S^z и его производных методом последовательных приближений по дисперсии, диссипации и нелинейности, получим во втором порядке:

$$\ddot{S}^z + \gamma\dot{S}^z + \tilde{\omega}_c^2 S^z - (I_0/J_0)[\omega_0^2 + \gamma^2] \times \\ \times(S^z)^2 + (1/2)(S^z)^3 = \tilde{\omega}_c^2 \chi\Omega, \qquad (37)$$

$$\chi = \chi^{ef}/(1 - J_0\chi^{ef}) = \{J_0(1 + \omega_0^{-1} J_0 S^{0x})\}^{-1}, \\ \tilde{\omega}_c^2 = [\omega_0^2 + \gamma^2](1 + \omega_0^{-1} J_0 S^{0x}). \qquad (38)$$

С другой стороны, согласно уравнению Ландау-Халатникова [5], можно записать

$$\ddot{S}^z + \gamma\dot{S}^z = -\nu\delta F/\delta S^z, \qquad (39)$$

где ν – коэффициент, F – свободная энергия системы псевдоспинов в механическом поле, которая вблизи T_c имеет вид [3]

$$F = F_0 + \hbar J_0\{(1/2)[1 - q\,\mathrm{th}(\hbar\omega_0/2k_B T)] \times \\ \times(S^z)^2 - (1/3)(I_0/J_0)(S^z)^3 + \\ +(1/4)(J_0^2/2\omega_0^2)[1 - \eta](S^z)^4\} - \hbar\Omega S^z, \qquad (40)$$

$$\eta = (1/2)(q - q^{-1})\ln(q + 1/q - 1), \\ +(1/4)(J_0^2/2\omega_0^2)[1 - \eta](S^z)^4\} - \hbar\Omega S^z. \qquad (41)$$

Из (37–41) видно, что статическая восприимчивость χ имеет полюс при $T=T_c$, как того требуют общетеоретические положения. Подставляя (40) в (39) и приравнивая друг другу правые части (37) и (39) получим

$$\gamma^2 = \omega_0^2[\eta/(1-\eta)], \lambda = 4q[\eta/(1-\eta)]^{1/2}, \\ \nu = [\omega_0^2/\hbar J_0(1-\eta)], \qquad (42)$$

$$\tilde{\omega}_c^2 = \omega_0^2[1-\eta]^{-1}(1+\omega_0^{-1}J_0S^{0x}), \delta = -I_0. \quad (43)$$

Таким образом, постулировав выполнение закона сохранения (5), и при наличии релаксации, нам удалось получить выражение (42) для диссипативного параметра γ в виде функций от ω_0, J_0.

Как следует из (42, 43), условие незаторможенности мягкой моды может быть записано в виде

$$\eta < [1 - q\text{th}(\hbar\omega_0 / 2k_BT))]. \quad (44)$$

Анализ (44) показывает, что данное условие выполняется лишь в узком интервале значений параметра $q\approx1$. Отсюда приходим к выводу о том, что в окрестности структурного перехода исходная структура – предпереходное состояние – конечная структура, где $q>>1$ (слабое, среднее туннелирование [3]), мягкая мода переторможена и динамика параметра порядка становится чисто релаксационной. Общее исследование низкочастотной динамики параметра порядка в окрестности структурного перехода может быть проведено на основе ур. (37). Однако соответствующий анализ является достаточно громоздким. Случай же $q>>1$ представляется более простым и физически наглядным. В пределе $q>>1$, ур. (37), при $\Omega=0$ принимает вид уравнения Колмогорова-Петровского-Пискунова в пространственно-одномерном случае:

$$\dot{S}^z = -\gamma[1 - q\text{th}(\hbar\omega_0 / 2k_BT)]S^z +$$
$$+\gamma(I_0/J_0)(S^z)^2 - \gamma^{-1}(J_0^2/2)(S^z)^3 + D\partial^2 S^z / \partial z^2, \quad (45)$$

где $D\approx\gamma a^2\approx\omega_0 a^2\approx10^{13}$ с$^{-1}$ (10^{-8} см$=10^{-3}$ см$^2\cdot$с$^{-1}$ – эффективный коэффициент диффузии, a – межатомное расстояние в кристаллической решетке, $v_{звука}=(\omega_0 D)^{1/2}\approx10^5$ см$\cdot$с$^{-1}$ – скорость звука в металлах. Как отмечалось выше, в низкочастотном длинноволновом приближении слагаемое, ответственное за пространственную дисперсию, может быть учтено аддитивным образом, простым добавлением в (37).

Полученные результаты для перехода исходная фаза – предпереходное состояние – конечная фаза, вызванного изменением температуры, могут быть пролонгированы на случай структурного перехода, стимулированного изменением внешней силы. Согласно результатам [3] в окрестности структурного перехода, вынужденного изменением внешней силы, поведение параметра порядка имеет релаксационный характер, что приводит к связи параметра порядка с компонентой механического поля напряжений $\Omega_i=\hbar\lambda^{-1}(\sigma)S_i^z$. Поэтому в окрестности структурного перехода, стимулированного деформацией, учет внешней силы сводится к перенормировке константы двухчастичного взаимодействия $\tilde{J}_0=J_0+\hbar\lambda^{-1}(\sigma)$, а динамика параметра порядка подчиняется ур. (45).

5. Обсуждение результатов и выводы

Одним из главных свойств рассматриваемого структурного перехода исходная структура – предпереходное состояние – конечная структура является то, что спонтанное появление отличного от нуля параметра порядка в исходной (конечной) фазе нарушает внутреннюю симметрию системы. Частота моды, восстанавливающей симметрию, должна непрерывно уменьшаться при $T\to T^+(T^-)$. В случае структурного перехода почти второго рода при $T=T^+(T^-)$ частота этой мягкой моды практически обращается в нуль. С другой стороны, при подходе к $T^+(T^-)$ со стороны предпереходного состояния частота мягкой моды понижающей симметрию предпереходного состояния также уменьшается при $T\to T^+(T^-)$.

Восстанавливающая сила для смещений атомов, отвечающих такой моде, стремится к нулю до тех пор, пока псевдоспиновая волна не конденсируется на границе устойчивости. Следовательно, статические смещения атомов при почти непрерывном переходе из предпереходного состояния в исходную (конечную) структуру представляют собой замороженные смещения мягкой псевдоспиновой волны. Параметром порядка при таком переходе является статическая компонента собственного вектора мягкой псевдоспиновой волны. Так как исходная (конечная) структура характеризуется макроскопической спонтанной положительной (отрицательной) разницей заполнения левого и правого минимума одночастичного потенциального рельефа, одинаковой на каждом узле, то мягкая псевдоспиновая волна является длинноволновой ($\vec{q}\to0$). Следовательно, псевдоспиновая волна является мягкой модой, с одной стороны, понижающей симметрию предпереходного состояния, а, с другой стороны, восстанавливающей симметрию исходной (конечной) структуры.

Феноменологический учет релаксации псевдоспинов в окрестности структурного перехода, основанный на выполнении закона сохранения квадрата длины вектора Блоха, который подчеркивает коллективный, когерентный характер релаксационных процессов, приводит к следующим результатам. Во-первых, удалось подтвердить такие известные эффекты, как смягчение коллективной моды, критическое замедление. Во-вторых, из предложенного подхода естественным образом вытекает важный вывод о том, что мягкая мода в окрестности структурного перехода исходная структура –предпереходное состояние – конечная структура переторможена и, следовательно, динамика параметра порядка имеет релаксационный характер. В-третьих, поскольку релаксационные процессы приводят к связи компоненты механического поля напряжений Ω_a с параметром порядка [3], динамика параметра порядка в деформируемом кристалле также имеет релаксационный характер.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пушин В.Г., Кондратьев В.В., Хачин В.Н. Предпереходные явления и мартенситные превращения. – Екатеринбург: УрО РАН, 1998. – 367 с.
2. Панин В.Е., Лихачев В..А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. – Новосибирск: Наука, 1985. – 229 с.
3. Слядников Е.Е. Предпереходное состояние и структурный переход в деформированном кристалле // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46. – В. 6. – С. 1065–1071.

4. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. — М.: Мир, 1975. — 270 с.
5. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1974. — 522 с.
6. Брус А., Каули Р. Структурные фазовые переходы. — М.: Мир, 1984. — 408 с.
7. Барьяхтар В.Г. Интегрируемость и кинетические уравнения для солитонов. — Киев: Наукова думка, 1990. — 386 с.
8. Беленов Э.М., Назаркин А.В. Низкочастотное приближение в нелинейных уравнениях // Письма в ЖЭТФ. — 1990. — Т. 51. — № 5. — С. 252—256.

УДК 533.75